

## 反応有機・無機・物理化学を総合的に理解するための 実践的な計算化学コース：分子間相互作用から化学反応まで

(中央大学<sup>1</sup>・立教大学<sup>2</sup>) 黒木 菜保子<sup>1</sup>・○望月 祐志<sup>2</sup>・○森 寛敏<sup>1</sup>

Practical computational chemistry course for a comprehensive understanding of organic, inorganic, and physical chemistry: from molecular interactions to chemical reactions  
(<sup>1</sup>Department of Applied Chemistry, Chuo University, <sup>2</sup>Department of Chemistry, Rikkyo University) Nahoko Kuroki,<sup>1</sup> Yuji Mochizuki,<sup>2</sup> Hirotochi Mori<sup>1</sup>

In all fields of chemistry, it has become essential to use quantum chemical calculations and machine learning for explaining and predicting chemical phenomena. However, it is challenging to apply textbook knowledge to practical research. In this study, we developed teaching material based on computational chemistry to promote the integration of knowledge from all fields of chemistry, including organic, inorganic, and physical chemistry, to bridge the gap between classroom learning and chemistry research. This experimental material, which comprehensively covers weak intermolecular interactions and chemical reactions, is expected to help students conduct purposeful research activities after being assigned to a laboratory.

**Keywords :** Upper-Division Undergraduate; Physical Chemistry; Computational Chemistry; Computer-Based Learning; Internet/Web-Based Learning

あらゆる化学の分野において、化学現象の説明や予測に、量子化学計算や機械学習を用いることが必要不可欠になっている。[1] しかし、教科書の知識を実践的な研究に応用することは、一般に学部生にとってハードルの高いものとなる。本研究では、有機化学、無機化学、物理化学など化学のあらゆる分野の知識の統合理解を促進し、教室での学習と、研究室レベルの実践的化学研究のギャップを埋めるための、計算化学に基づく教材を開発・公開した。[2,3] この実験教材は、弱い分子間相互作用や化学反応などを、最新の計算化学理論に基づき段階的かつ網羅的に扱っている (図 1)。学生が研究室に配属後に、目的意識を持って研究活動を行う助けとなることが期待される。

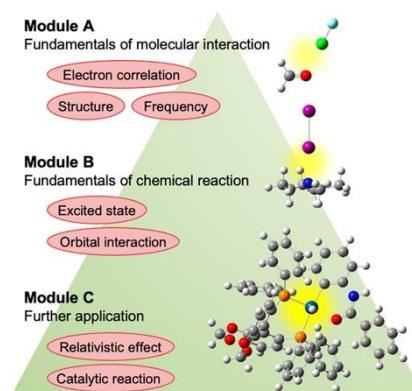


図 1 計算化学を基として開発した統合的的化学教育モジュール

- 1) Comprehensive Physical Chemistry Learning Based on Blended Learning: A New Laboratory Course, N. Kuroki, H. Mori, *J. Chem. Edu.* **2021**, *12*, 3884-3870.
- 2) Practical computational chemistry course for a comprehensive understanding of organic, inorganic, and physical chemistry: from molecular interactions to chemical reactions, N. Kuroki, Y. Mochizuki, H. Mori, *J. Chem. Edu.* **2023**, *in press*.
- 3) Computational Chemistry Course. <https://sites.google.com/g.chuo-u.ac.jp/jce2022/home> (accessed 2022-12-11)